PT-P033

KISTI plasma database를 이용한 단원자, 2원자 분자의 2D ICP 모델링

양원규, 주정훈

군산대학교 신소재공학과, 플라즈마 소재응용센터(PMRC)

우리나라 KISTI plasma database는 국가핵융합센터에서 수 년 간에 걸쳐 연구과제로 구축하고 있는 것으로써 매우 유용할 것으로 예상된다. 그러나 이 데이터를 상용 3차원 전산 유체해석 프로그램인 CFD-ACE+에 적용시키려면, 단위 환산, 데이터 포인트의 오류 수정, 플라즈마 모델에 적절한 반응식 세트의 조합 선정 등의 몇 가지 어려움이 있다.

본 연구에서는 Ar, He, Ne, CF_4, O_2, N_2에 대해서 비교하였다. JILA DB. University of Colorado를 사용하는 CFD-ACE+의 database와 KISTI에서 제공하는 chemistry database로 2차원 ICP 모델에서 수치해석을 시도하였다. KISTI chemistry database V2006에서 Ar의 61개 반응을 검증하면 전자온도가 0.77 eV로 잘못된 결과를 얻게 된다. 이는 sub-shell ionization에서 collision cross section 값 중 10eV일 때, 64eV 값 때문에 에너지 소모로 인한 것임을 알 수 있었고, 이를 제외한 계산에서는 2.7 eV의 전자온도와 3×10^{11} #/cm^3의 전자밀도의 결과를 얻었다. He, Ne의 결과에서도 KISTI의 database로는 계산 수렴은 되나 전자온도, 전자밀도의 값이 실제 플라즈마가 발생하지 않는 것으로 계산이 된다.

수집된 데이터들을 이렇게 바로 사용할 수 없기 때문에 모델링과 실험에서의 검증이 필요하며, 또한 공간 반응 외에도 표면 반응이 수치해석을 위해 더 많은 연구가 필요하다.